Mode d'emploi du logiciel chemsketch : Exemple avec la molécule de chlorométhane CH₃Cl

A partir du bureau, lancer le logiciel en cliquant sur l'icône 3D-Viewer et cliquer su OK En bas de l'écran à gauche, choisir le menu 1-Chemsketch 1-ChemSketch 2-Copy to 3D 3-3D View Choisir l'atome de carbone C dans le menu à gauche et le placer dans la zone de dessin grâce à la souris ; une formule apparaît avec l'atome de carbone et des CH4 atomes d'hydrogène. Any Dans le menu à gauche, choisir l'atome de chlore Cl à la souris et étirer à partir du C carbone C pour créer la liaison C-Cl. н N n Dans le menu Tools, sélectionner 3D structure optimization F X ACD/3D Viewer (Freeware): ChemSketch Window - [noi Na File Edit Pages Tools Templates Options Documents Add-Ons Si Structure Properties Alt+Shift+S Structure P S Clean Structure Ctrl+Shift+T CI Check Tautomeric Forms 3D Structure Optimization Ctrl+Shift+3 K En bas de l'écran, à gauche, choisir le menu 2-Copy to 3D sept. 29 13:21 ACD/Labs Announces ADMET & ●●● I-Lab Login NONAME01.SK2 1-ChemSketch 2-Copy to 3D 3-3D View m chems - Microsoft démarrer On obtient alors: 🔀 ACD/3D Viewer (Freeware) - [noname01.s3d] File Edit View Tools Options ACD/Labs Help | Carrier of the control of the con

Remarques:

- Si une molécule possède une liaison multiple entre deux atomes, il suffit de cliquer avant l'optimisation sur la liaison concernée.
- Dans le bandeau supérieur, on pourra trouver les outils nécessaires pour déterminer les caractéristiques de la molécule (longueur de liaison, angle ...)